



TITLE:

擬1次元導体におけるソリトン型励起と電子構造(物性におけるソリトン,基研研究会「ソリトン系のダイナミクスとそれに関するカオスの問題」,研究会報告)

AUTHOR(S):

村尾, 剛

CITATION:

村尾, 剛. 擬1次元導体におけるソリトン型励起と電子構造(物性におけるソリトン,基研研究会「ソリトン系のダイナミクスとそれに関するカオスの問題」,研究会報告). 物性研究 1985, 45(1): 46-48

ISSUE DATE:

1985-10-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/91813>

RIGHT:

異方性のパラメータ D に臨界値があり、それ以上では $\sqrt{D-D_c}$ に比例するが、 D_c 以下では図 3 に見られるごとく、重心運動はなく、静止点周りの振動が観測される。十分小さい D の値に対しては、静止する。

図 4 は kink の運動エネルギーが(3)の第 2 式 $\phi = D \sin \theta$ によっていることを示している。即ち spin の z 方向の傾き θ が 0 でなくなった位置でのみ ϕ の回転運動が行われる。勿論全エネルギーは保存されているので、磁場方向にドメインが広がる損は z 成分の傾きによるゲインでまかなわれている。

以上の数値解析から離散格子の効果である Pinning と Oscillation が磁気ソリトンの運動にも見られることが判かる。また Damping は、このレポートのデータのみでは何とも言えないが、他のデータと総合して考えると、小振幅の線型波を発生しつつ減衰していくことが判かる。

References

- 1) H. Meikeska, J. Phys. **C11** (1978), L29.
- 2) P. Kumar, Phys. Rev. **B25** (1982), 483; Physica **D5** (1982), 359.
E. Magyari and H. Thomas, Phys. Rev. **B25** (1982), 531.
- 3) G. Wysin, A. R. Bishop and P. Kumar, J. Phys. **C15** (1982), L337.
- 4) R. Liebmann, M. Schobinger and D. Hackenbracht, J. Phys. **C16** (1983), L633.
- 5) G. Wysin, A. R. Bishop and P. Kumar, J. Phys. **C17** (1984), 5975.
- 6) J. F. Curie, S. E. Trulinger, A. R. Bishop and J. A. Krumhansl, Phys. Rev. **B15** (1977), 5567.

擬 1 次元導体におけるソリトン型励起と電子構造

京大・理 村 尾 剛

擬 1 次元導体におけるソリトンまたはソリトン型励起状態についての論文は数多く見られるが、その電子状態までを考慮して議論したものは、ポリアセチレンを除いてはほとんど見当らない。通常の金属から見ると、ポリアセチレンは特殊な系であり、もう少し通常の金属につながる仕事が望まれる。そのような意味で、金属で大変成功を収めた擬ポテンシャルの方法を基礎にした筆者の擬 1 次元系の仕事を用いて、ソリトン型励起を考察した。

詳細は原論文¹⁾にゆずることにして、ここではその要旨だけを述べることにしよう。擬ポテ

ンシャルの理論によると、伝導電子および格子系の全エネルギーは、正常な結晶状態を基準にして

$$\delta U_{\text{tot}} = L_Z \sum_q \{ |\tilde{S}_{\parallel}(q)|^2 - \sum_G \delta_{q,G} \} \mathcal{F}(q) \quad (1)$$

$$\begin{cases} \tilde{S}_{\parallel}(q) = N^{-1} \sum_l \exp[-iq(Z_l + \langle \delta Z_l \rangle + \delta Z_l)] \\ \mathcal{F}(q) = F(q) + H(q) \end{cases} \quad (2)$$

で与えられる。構造因子 $\tilde{S}(q)$ における $\langle \delta Z_l \rangle$ は構造の不安定性に伴う変位、 δZ_l はフォノンの変位、 $F(q)$ は band-structure term で誘電常数を $[1 - \epsilon(q)^{-1}]$ の形で含み、 $H(q)$ は electrostatic term である。この $\langle \delta Z_l \rangle$ を

$$\langle \delta Z_l \rangle = \sum_{p=\pm 1} A_l \exp[ip(Q_0 Z_l + \phi_l)] \quad (Q_0 = 2k_F) \quad (3)$$

と表わしたとき、パイエルス状態では A_l も ϕ_l も l によらない常数であり、ソリトン領域では

$$\phi_l - \phi_0 = \begin{cases} \phi_A \tanh[q_s(Z_l - Z_0)] & (\text{AS ソリトン}) \\ \phi_A |\tanh[q_s(Z_l - Z_0)]| & (\text{S ソリトン}) \end{cases} \quad (4)$$

とおく。 ϕ_l の形から、第1を antisymmetric、第2を symmetric なソリトンとよぶ。それぞれを図1に示す。ここで考えるのは、全体として電気的中性を保ったソリトンであるので、AS ソリトンには自由なフェルミ面をもたねばならないが、図からもわかる通り、ソリトン領域では電子状態が不連続な準位に量子化されるので誘電常数の Q_0 での発散がおさえられる。後の数値計算のために \tanh は展開して線型項だけをとる。これは $Q_0 \rightarrow Q_0 + \delta Q$ に当る。

構造因子を含む項を δZ_l について展開して

$$|\tilde{S}_{\parallel}(q)|^2 - \sum_{q,G} \delta_{q,G} \equiv \Sigma(q) = \Sigma_0(q) + \Sigma_1(q) + \Sigma_2(q) + \dots \quad (5)$$

とすると、第1項は構造エネルギー、第2項は安定性の条件、第3項は調和フォノンを与える。更に $\mathcal{F}(q)$ は $\tilde{\epsilon}(q)$ を含むので、これからも同様な寄与があることを注意しよう。²⁾ ここで考えている変数には δQ と振幅 A とがあり、この2変数の変化に対して系のエネルギーの変化

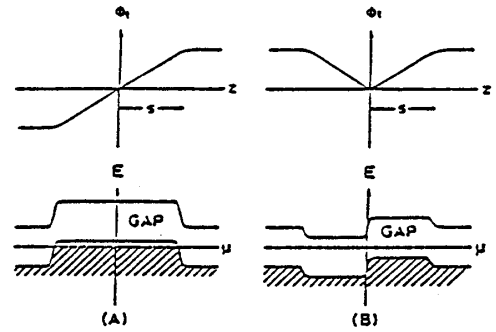


図1. (A) AS ソリトン.
(B) S ソリトン.

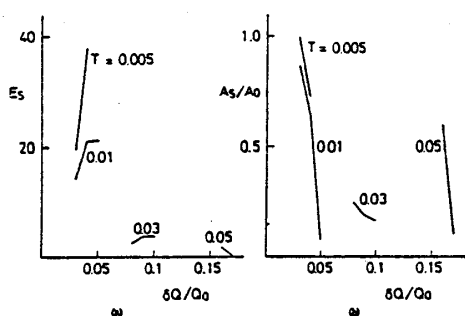


図 2. AS ソリトン. $K_1=5$, $K_2=K_3=3$, $\delta=0.025$.

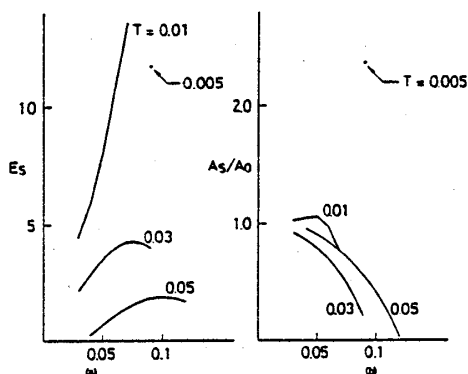


図 3. AS ソリトン. $K_1=K_2=K_3=1$, $\delta=0.025$.

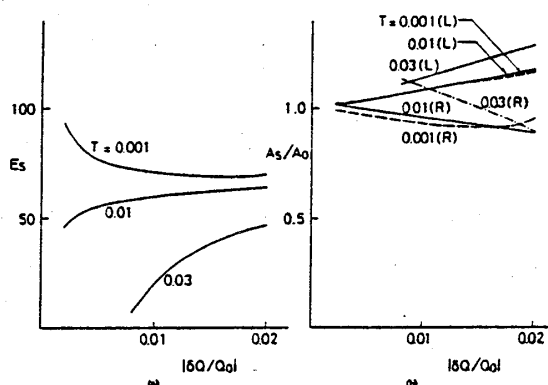


図 4. S ソリトン. $K_1=-1$, $K_2=1$, $K_3=2$, $\delta=0.05$. R と L は右および左側の領域を指す.

は単調ではない. δQ を与えたとき, 系の安定条件を満たす A が求まれば, その準安定状態をここでのソリトン型励起状態としてとらえた. どのような δQ の領域または温度領域にそれが現われるかと云うことを見るために数値計算を実行し, その中の典型的な結果を図 2~4 に示す. 図中, E_s は適当な量で還元されたソリトンの励起エネルギー, A_0 と A_s はパイエルス状態およびソリトン領域での(3)の振巾, また $K_1 \sim K_3$ は E_s および安定条件の表式に現われるパラメーター, $K_4 \sim K_6$ はソリトン領域に整合性を要求した時に付加的に現われるパラメーターであり, $\delta = (\text{パイエルス・ギャップ})/2\epsilon_F$, 温度 T は $k_B T/2\epsilon_F$ を表わしている.

文献

- 1) T. Murao, J. Phys. Soc. Jpn. **53** (1984) 3903, 3912.
- 2) T. Murao and Y. Nagaoka, J. Phys. Soc. Jpn. **52** (1983) 2976.